

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ СОЛИОННОГО ЭЛЕКТРОЛИТА СОСТАВА $\text{BaCe}_{1-x}\text{Nd}_x\text{O}_3$

Старков Я.М.¹, Демин А.К.²

¹Уральский государственный университет;

²Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН, Екатеринбург

Среди высокотемпературных протонных твердых электролитов наибольшей проводимостью обладают сложные оксиды со структурой перовскита (ABO_3) [1]. К ним относятся материалы на основе BaCeO_3 и SrCeO_3 . Следует отметить, что в этих сложных оксидах протонная проводимость существует наряду с кислородионной, поэтому правильнее их называть "соионные электролиты". Интерес к этому классу проводников связан с возможностью их использования в качестве основы для различных электрохимических устройств, например, топливных элементов, электролизеров для получения водорода и т.д.

Экспериментальные образцы состава $\text{BaCe}_{1-x}\text{Nd}_x\text{O}_3$ ($x = 0,1 - 0,2$) получали методом твердофазного синтеза из смеси соответствующих оксидов и карбонатов. Предварительный синтез порошка проводили при температурах 900 и 1100 °С, а сформированные образцы спекали при температуре 1550 °С 3 часа.

По данным рентгенофазового анализа образцы состава $\text{BaCe}_{0,9}\text{Nd}_{0,1}\text{O}_3$ являются однофазными и имеют структуру типа перовскита. Плотность полученных образцов составила 92% от теоретической.

Для всех образцов были исследованы температурные зависимости коэффициента термического линейного расширения. Было показано, что все составы, независимо от добавки Nd, имеют фазовые переходы в области температур 450 – 500 °С, что согласуется с литературными данными [2]. Стоит также отметить, что увеличение допирующей добавки приводит к увеличению коэффициента линейного термического расширения в высокотемпературной области.

На рис.1 представлена температурная зависимость проводимости состава $\text{BaCe}_{0,9}\text{Nd}_{0,1}\text{O}_3$, из которой видно, что проводимость на воздухе (кривая 1) ниже, чем в восстановительной атмосфере (кривая 2) при низких температурах, а в области высоких температур проводимость на воздухе выше. Следует также отметить, что в восстановительной атмосфере температурные зависимости проводимости при нагревании и охлаждении носят разный характер. Полученные экспериментальные данные очень интересны и требуется более глубокое изучение этих составов, чтобы объяснить механизм проводимости в разных атмосферах.

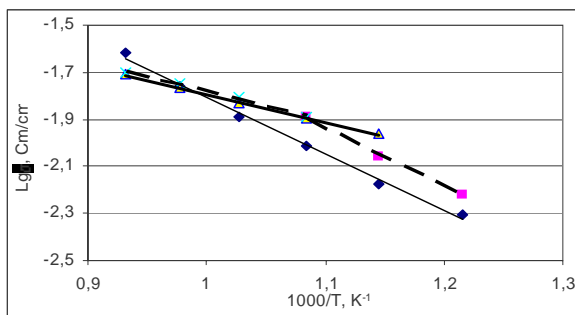


Рис. 1 Температурная зависимость проводимости состава $\text{BaCe}_{0.9}\text{Nd}_{0.1}\text{O}_3$
 1 – на воздухе,
 2 – в восстановительной атмосфере при нагревании,
 3 – в восстановительной атмосфере при охлаждении.

На основании полученных данных можно предположить, что синтезированный материал является перспективным для использования в качестве электролита в различных электрохимических устройствах.

1. Пальгуев С.Ф., Высокотемпературные протонные твердые электролиты, Екатеринбург: УрО РАН, 1998, 82 с.
2. А.В. Кузьмин, В.П. Горелов // Фазовые переходы в системе $\text{BaCe}_{1-x}\text{Nd}_x\text{O}_3$, электрохимия 2003, том 39, № 5, с. 506-512.

ЗАДАЧА ОДНОЗНАЧНОГО ВОССТАНОВЛЕНИЯ СЛОЖНОЙ ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ ПО ГРАФУ

Давлетова Л.Д., Гареева Л.Р.

Башкирский государственный университет, Уфа

В настоящей работе рассматривается проблема однозначности восстановления химической реакции с нетривиальными стадиями, соответствующей данному графу, вершины которого отвечают веществам, участвующим в реакции.

Как известно, по двудольному графу Вольперта уравнения сложной химической реакции восстанавливаются однозначно. С точки зрения наглядности больший интерес представляли бы графы, вершины которых соответствуют только веществам. В этом случае появляется неоднозначность расшифровки. Однозначность есть в случае сохранения разметки графа. Но даже для простейшего неразмеченного графа появляется масса допустимых вариантов.

В данной работе был предложен алгоритм проверки однозначности восстановления реакции по графу и проиллюстрирован на примере графа, соответствующего реакции метана с водяным паром на поверхности никеля. Показано, что этот граф расшифровывается однозначно. Граф разбивается на непересекающиеся фрагменты (полные двудольные подграфы), причем каждой стадии соответствует максимальный двудольный